

京都大学	博士（理学）	氏名	荒木 元
論文題目	Steplike electric conduction in a classical two-dimensional electron system through a narrow constriction in a microchannel		
（論文内容の要旨） 本論文では、ヘリウム上の設けられたマイクロチャンネル中の古典電子の運動を分子動力学法によってシミュレートして、印加電圧の増加に伴い擬似的に階段状に電気伝導度が増加するという理研の河野グループの実験を数値的、理論的に再現したものである。特にチャンネル中に設けられたボトルネック的役割を果たすゲートを抜ける際に現れる電子の流れを可視化し、その流れやゆらぎと観測される電気伝導度との関係を明らかにした点で注目に値する。その主たる部分は、Physical Review B に刊行されている。 本論文の第一章は、導入部分であり、チャンネル中の電子輸送に関する過去の研究のレビューになっている。 第二章では、ヘリウム上の電子の特性を簡単にまとめた後、マイクロチャンネル中の電子が受けるポテンシャルがどのような形を持つかを、ポアソン方程式を解く事で明らかにし、更に本論文で用いたグラントカノニカルアンサンブルに対する分子動力学法(MD)の方法論を詳しく説明している。更にシミュレーションのセットアップと電気伝導度の計算法についても簡単にまとめている。 第三章は本論文の中心部分であり、電気伝導度の印加電圧依存性や、その微分係数が如何に印加電圧に依存するかシミュレーションの結果が報告されている。更に時間平均によって、空間の各点で電子が感じるポテンシャル、ボトルネック部分のポテンシャル障壁、ポテンシャルエネルギーのゆらぎ、時間平均した電子流が印加電圧によって一列、二列、三列という状態変化をする事、またゆらぎの効果で例えば特定の印加電圧の値によっては、二列流と三列流は時間によって互いに遷移することを明らかにした。実験では電子の位置を完全に捕捉する事はできないだけに貴重な興味深い報告になっている。 第四章では、シミュレーションで得られた結果に考察を加えている。例えば、印加電圧が余り大きくない場合には、密度ゆらぎに応じてポテンシャルがゆらぎ、それを介して電子がポテンシャル障壁を越えて電流が流れるという描像を提示し、それによって計算した電気伝導度の印加電圧依存性がシミュレーションで観測されたものと良好な一致を示した。また、実験で観測された電気伝導度とシミュレーションの不一致の原因、Langevin dynamics によるシミュレーションと MD の比較等を行った。 第五章は本論文の結論であり、得られた結果を簡潔にまとめている。 本論文の特徴は公表論文に載っていない詳細な Appendices にある。Appendix A ではシミュレーションに必要なチャンネル中のポアソン方程式の解の詳細や、量子力学に基づく電子運動が、ヘリウム液面に鉛直方向に量子化され、水平方向には古典的に扱って良い理由を詳細に説明している。Appendix B ではシミュレーションで用いたマイクロチャンネルの説明と、その中の電気伝導度を Boltzmann 方程式で計算した場合にどのような値になるかを説明している。Appendix C では MD の方法論の詳細を説明している。Appendix D は様々なパラメータに電気伝導度がどう依存するかを報告している。Appendix E では物理量の計算法を詳細に説明している。Appendix F ではポテンシャルゆらぎが実際に理論解析で仮定したガウス分布を満たす事を確認している。Appendix G では第四章で紹介した Langevin dynamics シミュレーション法の方法論のアウトラインを説明している。			

(論文審査の結果の要旨)

申請者の学位論文の主要部はほぼ既に学術誌に刊行した公表論文に沿ったものであり、公聴会においてもその構成は共通したものであった。公聴会では、学外から当該分野の専門家を審査委員の一人として招待した中で、申請者が40分強の説明をし、その説明が終わった後に30分程度の質疑に基づく試問が行われた。

質疑に先立ち、学外の専門審査委員から、実験とほぼ対応するシミュレーションが行われただけでなく、実験で可視化出来ない電子の動きが手に取るように分かる優れた研究である点の称賛があった。

審査委員からの質問で、目についたのは電気伝導度の印加電圧に対する微係数（特にその極大、極小の持つ意味）と電子流のレーンの形成の関係を問うものと、申請者のゆらぎに基づく電気伝導の現象論に関するものであった。前者については、申請者の最初の説明では連続的に流れる1レーンの流れと、断続的にポテンシャル障壁を越える電子による伝導の間の違いがあまり明確に説明されていなかったための混乱に基づいている。後者は単純に申請者の物理描像の非自明さに根ざしたものであろう。これらの質問に対して申請者は、例えば前者であれば微係数の極大では安定なレーンのどちらも取り得るが、極小では安定なレーンが唯一に決まる事等、その研究結果を丁寧に説明し、的確に答えていた。

また、解析では2次元古典電子モデルを用いたが、ヘリウム液面に鉛直な自由度が混合することはないのかという質問が出たが、それに対して申請者は、鉛直方向が量子化され第一励起状態に上がるのに必要な熱エネルギーを得ることのできない低温系である点を説明し、取り扱いの妥当性を示した。

空間相関の効果、特に解析では一体分布の時間ゆらぎをベースに議論していたが、長波長ゆらぎを通した多体効果は効かないのかという質問があった。それに対して短波長ゆらぎがメインであると思われるが、詳細は分からない旨の申請者からの回答があった。

テクニカルな質問として Langevin dynamics と MD の差異、特に電気伝導度の立ち上がりについては前者の方が実験に近いがその理由を問う質問があった。それについて申請者から前者のポテンシャルゆらぎが半分であり、電気伝導の開始が阻害される点を説明した。同様なテクニカルな質問として、申請者の用いたグランドカノニカルアンサンブルに対する MD、特に fractional particle の導入についての質問があった。それについて fractional particle ではなく、通常の電子を生成消滅させると、本研究で用いた1000電子程度のシミュレーションでは、その影響が遠方に及び、それを回避するために本手法を採用した旨の回答が申請者からあった。

他に実験とシミュレーションの定量的な違いについての質問があったが、申請者が設定した電子密度が実験の1/8程度であり、密度を上げるとシミュレーション結果が実験結果により近づく点を説明した。

その他、審査委員から主要部の公表論文との重複が大きい点が問題である点が指摘され、公聴会での説明に沿って論文の導入部（第一章）と結論部分（第五章）の書き直しが要求された。しかしながら、内容的には学位取得に十分叶うものである点に関して、審査委員一同の合意が取れた。

よって、本論文は博士（理学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成25年1月16日に論文内容とそれに関連した事項について試問を行った。その結果、合格と認めた。